

計算材料設計システム「MASPHYC」

富士通株式会社 計算科学研究センター 竹内 宗孝

take@strad.se.fujitsu.co.jp

1. はじめに

今世紀のなかばに誕生した分子動力学法は、原子間または分子間の相互作用力からニュートン力学を用い物質の物性値や原子レベルの構造情報を与える方法であり、物質科学の理論、実験に次ぐ第3の手法として注目されています。当初はエネルギー一定の単純なアルゴリズムしかなく、適用できる系や分野も限られていましたが、1980年なかばに定圧、低温のアルゴリズムが Rahman, Parrinello, 能勢らによって完成し、物質の相転移や結晶構造予測などが計算可能となり材料科学への本格的適用が始まり今日に至っています。最近のコンピュータの急速な発展ともあいまって分子動力学は、計算の（分子動力学の）専門家の研究対象から物質、物性、材料の実験系研究者のツールとして急速に発展しています。本総合情報処理センターに、今回導入した汎用的分子動力学システム「MASPHYC」は、樹脂や液晶などの有機物や非線形光学材料のような高機能性材料はもちろんのこと、金属、セラミックスといった無機物にも適用できる点に大きな特徴があります。適用系が広範にわたり、また多くの結果解析機能を有した今回の汎用分子動力学システムの導入は、特にどちらかというと、これまで計算が専門ではない様々な分野の実験系研究者にセンターを利用して計算を行う機会を与えるものとおもわれます。

2. システムの特長

本システムは、富士通が独自に開発したものであり、以下の特徴を有します。

- (1) Sunワークステーション上で動作するプリ・ポストシステム（「MASPHYC/WB」）が用意されており計算機の専門家でなくとも、簡易にデータ作成、結果の表示をインタラクティブに行うことができます。
- (2) 規則正しく並んだ結晶はもちろんランダムな液晶やアモルファス状態のモデリングも簡単に実現できます。さらに、細胞膜の二重膜構造、金属の粒界や転位などの複雑なモデリングでも簡単マウス操作と視認性の良いグラフィカルインターフェースにより容易に行うことができます。

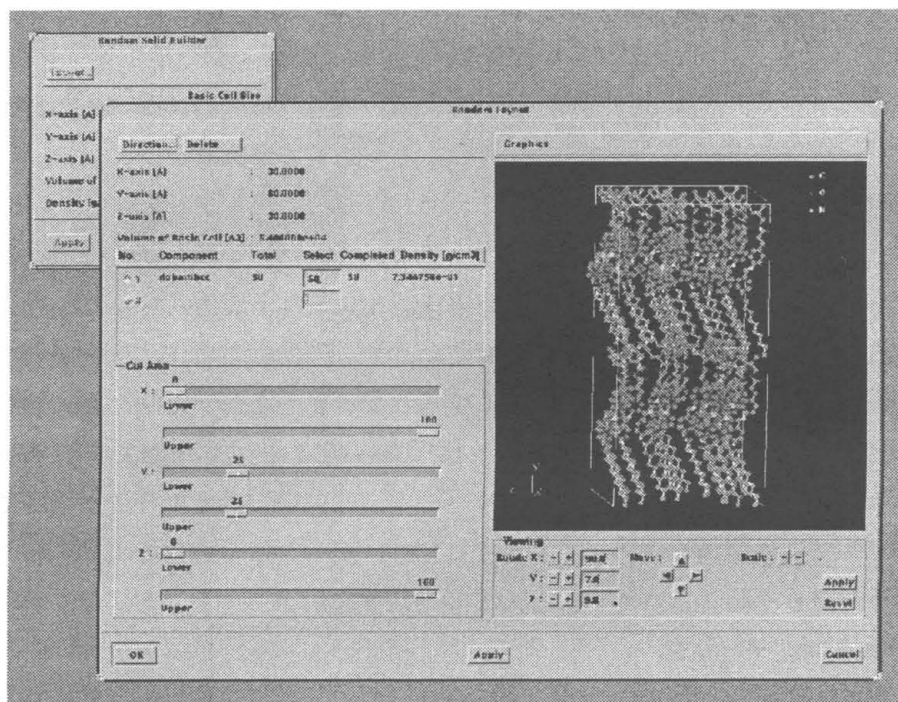


fig1 液晶のモデリング

分子動力学で最も重要である、原子間ポテンシャルが充実しており生体物質や樹脂、液晶などの有機物から金属・セラミックスなどの無機物まで幅広く計算できます。

またポテンシャルライブラリ機能により新規のポテンシャル関数の追加も容易に行うことができます。

関数名

適応系

Lennard-Jones	樹脂, 生体物質
BMH	イオン性結晶, 酸化物, シリケート
Johnson	鉄, ニッケル
Stillinger-Weber	半導体
Morse	金属
Finnis-Sinclair	金属
Tersoff	半導体 (Si, C, Ga, As 他), SiC, Si ₃ N ₄
Long Range Finnis-Sinclair	合金
Voter-Chen	合金
水素結合ポテンシャル	有機物
各種分子内ポテンシャル 11 種	有機物

ポテンシャル関数と適用系

- (3) 拡散定数や、動径分布関数、X線や中性子線の散乱強度、弾性定数のテンソル成分算出などの二次解析機能が充実しています。
- (4) 分子動力学シミュレーターは、温度制御にスケーリング法および Nose 法、圧力制御に Parrinello-Rahman 法を採用しており、任意の温度・圧力の組合せについて、自在に設定したシミュレーションが行えます。
- (5) MDL Molfile 形式の分子構造データ、ICSD 形式の結晶構造データなど著名なデータ形式とのインターフェースがとれます。また、各種入出力ファイルのフォーマットを公開しているので他の解析プログラムとの連携が行えます。
- (6) 経験豊富な専門スタッフによる信頼と実績あるサポートを富士通が行います。また富士通の完全自社開発システムであるため、ユーザからの要望の機能追加にも迅速かつ柔軟に対応しレベルアップ版に反映していきます。

特に、上記(3)に関しては半導体や非酸化物セラミックスに使われる各種3体力ポテンシャルや金属系に用いられるEAMポテンシャルもサポートしています。この機能は汎用システムとしては国内のシステムはもちろん、世界的にも例がなく、MASPHYC独自の機能となっています。

3.適用事例

3-1 金属の圧力誘起相転移

一軸応力に誘起された構造相転移は結晶格子の変形により進行する、原子の拡散を伴わない相変態と言われています。RGL ポテンシャルを用いたシミュレーションによりニッケルの hcc →hcp 相転移が観測され転移に伴う時々刻々の原子の動きが追跡できました。

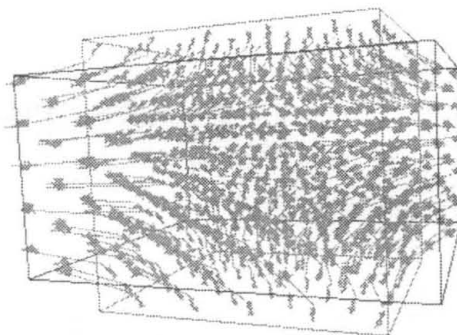


fig2 相転移前後における原子の軌跡と MD 基本セルの変形

(日本機械学会 原子/分子モデルを用いる材料の強度評価シンポジウム 1995.9 にて発表)

3-2 脂質二層膜中の直鎖アルカンの挙動

リン脂質二層膜は細胞膜の基本的構造であると同時に、生体膜としての様々な優れた機能を持っています。その性質の一つは小さな分子を透過させる働きですがその動的機構についてはまだ明らかになっていません。ここでは MASPHYC によるシミュレーションにより二層膜中の直鎖アルカンの挙動を調べました。

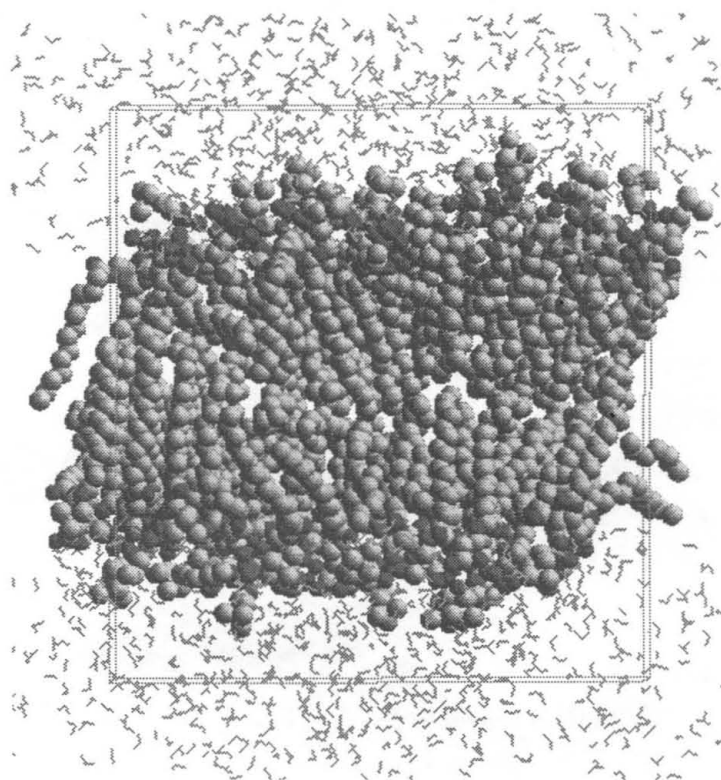


fig3 水の層に挟まれた脂質二層膜内の n-pentane のスナップショット (1997.3 日本化学会春季大会で発表)

3-3 シリカライト中のメタン吸着

シミュレーション多孔質材料であるシリカライト (ZSM-5) 中におけるガス分子 (メタンガス) の吸着シミュレーション例です。メタンガスの吸着サイト, 拡散挙動を知ることができます。

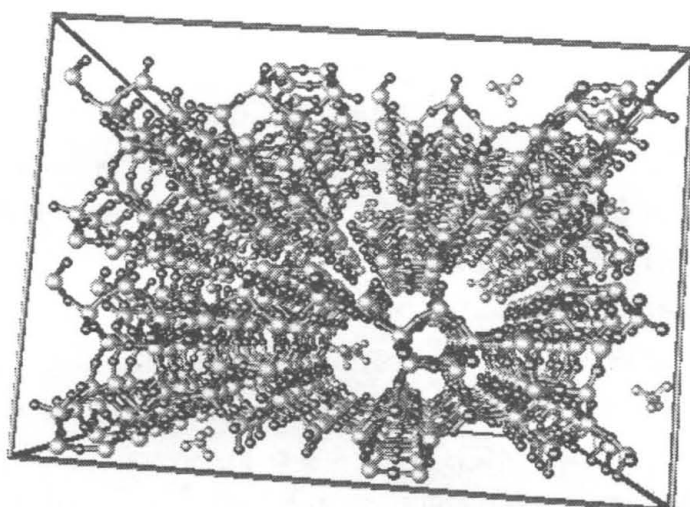


fig4 シリカライト中の空孔を移動しながら拡散するメタン分子

4. システム構成

MASPHYC のシステム構成を以下に示します。システム全体は、プレ/ポスト処理を行うワークベンチ部である MASPHYC/WB と分子動力学の計算を行う MASPHYC/MD の 2 つのシステムから構成されます。

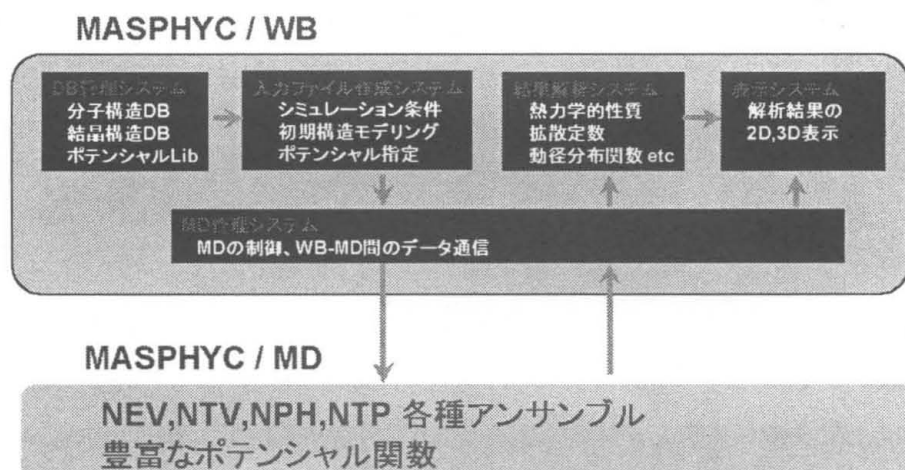


fig5 MASPHYCのシステム構成

MASPHYC/WB はさらに次の 5 つのサブモジュールから構成されています。

4-1 データベース管理システム

「結晶構造データベース」，「分子構造データベース」，「ポテンシャルライブラリ」から構成されています。「ポテンシャルライブラリ」は，標準提供のもので有機物から半導体，セラミックス，金属まで幅広く対応できますが，さらにユーザ自らライブラリを作成，登録することで適用範囲をさらに拡大することができます。4-2 MD 入力データ作成システム MASPHYC/MD を実行するのに必要なデータを作成するシステムです。全ての操作はマウス操作を基本として行われ，煩雑なラインコマンド入力は一切必要ありません。4-3 MD 管理システム作成されたMD 入力データを MASPHYC/MD が動作するマシンに転送し，自動起動します。また，CPU 経過時間，処理状況，使用メモリー量などの実行状況をインターラクティブに確認できます。計算終了後は出力データを MASPHY/WB に転送します。4-4 結果解析システム MASPHYC/MD で計算した出力データを二次加工して，自己拡散定数や弾性定数などを計算します。計算結果の表示は次に説明する「表示システム」で行います。4-5 表示システム MASPHYC/MD 出力ファイルおよび結果解析システムの解析結果を二次元，三次元グラフィックスで表示します。表示メニューには拡散定数や弾性定数の他に温度・圧力などの熱力学量，時々刻々のミクロな原子構造などがあります。

5. おわりに

今回の「MASPHYC」の導入によって，これまでは生体高分子分野の研究者に限れていた分子動力学の利用分野が機能性材料、また金属、セラミックスといった無機物分野にまで拡大しました。センターを共同利用施設としてとらえた場合、様々な”材料”研究者に計算機リソースを提供拡大していくことは極めて重要な責務です。特に現状ではCPUは稼働率が高いが利用者や利用部署が限られているという声も聞こえています。今回の汎用分子動力学システムの導入により、利用できる分野の研究者数が飛躍的に拡大することを期待します。